

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

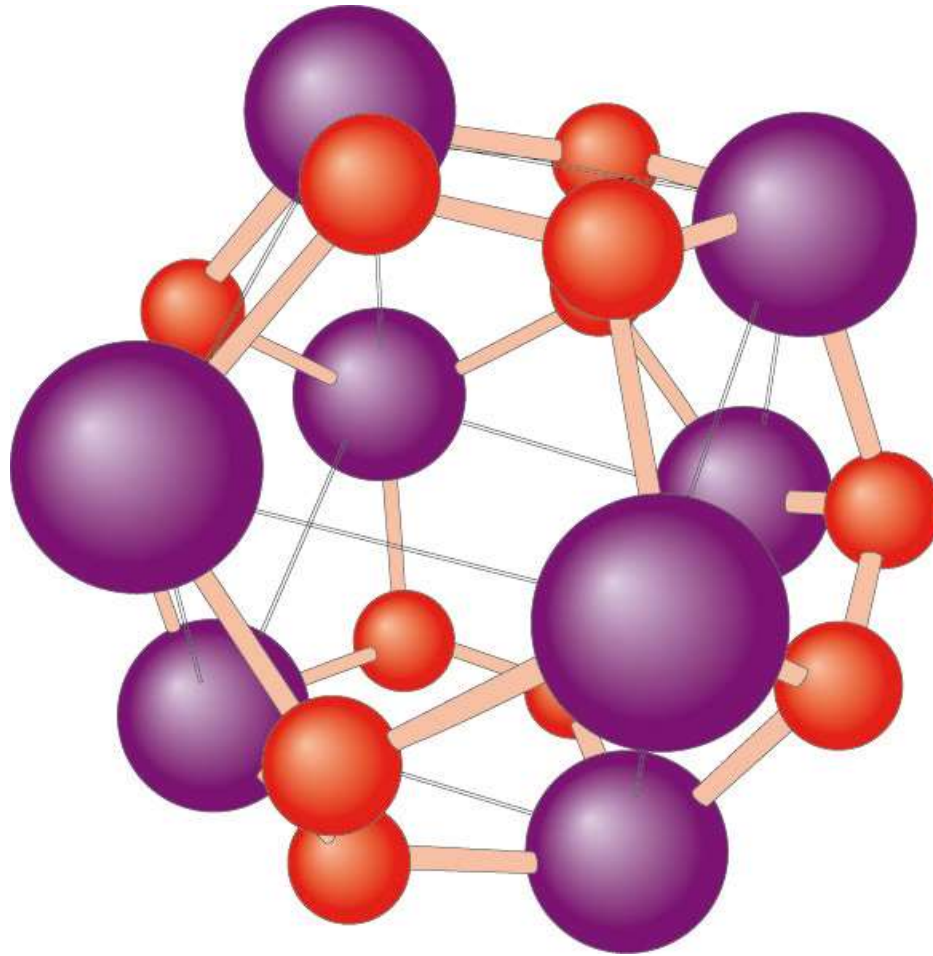
Этап 2. Алгоритмы. Презентация по
алгоритмам решения задачи.

Работу выполнили студентки НПИбд-02-18

Бурба А. В., Крючкова В. М., Никитаева А. С.,

Фогилева К. М., Шапошникова А. С.

Металлические кластеры



Алгоритм выполнения работы

Свойства атома

Название, символ, номер Бор / Borum (B), 5

Атомная масса
(молярная масса) [10,806;
10,821]^{[комм 1][1]} а. е. м. (г/моль)

Электронная
конфигурация [He] 2s² 2p¹

Радиус атома 98 пм

Химические свойства

Ковалентный радиус 82 пм

Радиус иона 23 (+3e) пм

Электроотрицательность 2,04 (шкала Полинга)

Степени окисления -3;0;+3

Энергия ионизации
(первый электрон) 800,2(8,29) кДж/моль (эВ)

Термодинамические свойства простого вещества

Плотность (при н. у.) 2,34 г/см³

Температура плавления 2 348 К^{[2][3]} (2075 °С)

Температура кипения 4 138 К^[2] (3865 °С)

Уд. теплота плавления 23,60 кДж/моль

Уд. теплота испарения 504,5 кДж/моль

Молярная теплоёмкость 11,09^[4] Дж/(К·моль)

Молярный объём 4,6 см³/моль



Кинетическая энергия и её зависимость от температуры

$$T = \frac{2 * \text{sum}(E_k)}{(2 * N - 3) * k'}$$

$$\text{sum}(E_k) = \frac{T * (2 * N - 3) * k}{2},$$

где N – число частиц в кластере, k – постоянная Больцмана
Постоянная Больцмана $k = 1,380649 * 10^{-23}$ Дж/К

Условия



Итог алгоритма

